Вестник
МОСКОВСКОГО УНИВЕРСИТЕТА
№ 4—1976

УДК 539.293 : 536.21

П. Г. ЖУМАТИЙ

ЭЛЕКТРОННЫЕ СВОЙСТВА НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ПЛАВНО МЕНЯЮЩИМСЯ СЛУЧАЙНЫМ ПОЛЕМ. ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ

На основе точных выражений для кинетических коэффициентов типа формулы Кубо и квазиклассической теории движения частиц в случайном поле получены формулы для электронной теплопроводности неупорядоченных полупроводников.

Настоящая работа составляет продолжение работ [1—3], в которых рассчитаны концентрация носителей заряда [1], статическая электропроводность и подвижность [2], термоэдс и высокочастотная электропроводность [3] неупорядоченных полупроводников. Как и в предшествующих работах, электрон-электронное взаимодействие будем учитывать только через экранирование и условие нейтральности, электрон-фононным взаимодействием пренебрегаем. Потенциальная энергия электрона в периодическом поле решетки учитывается методом эффективной массы в «однозонном» его варианте. Закон дисперсии в отсутствие случайного поля будем считать простым параболическим. Вычисления относятся к «гладкому» случайному полю, в котором пространственные производные потенциальной энергии электрона в среднем всюду ограничены. При явном усреднении по случайному полю будем считать, что вероятность реализации того или иного вида потенциальной энергии носителя заряда дается гауссовским функционалом. Результат усреднения физической величины по гладкому случайному полю выражается с помощью двух параметров:

$$\psi_1 = \langle [U(\bar{\mathbf{x}})]^2 \rangle < \infty, \quad \psi_2 = \frac{1}{2} \langle [\bar{\nabla} U(\bar{\mathbf{x}})]^2 \rangle < \infty. \tag{1}$$

Здесь угловые скобки обозначают усреднение по случайному полю.

Условие квазиклассичности случайного поля $U(\bar{\mathbf{x}})$ имеет вид

$$\psi_1^{3/2} \gg \frac{\hbar^2 \psi_2}{4m}. \tag{2}$$

Неравенство (2) составляет точный смысл представления о плавном случайном поле; средний квадрат напряженности последнего достаточно мал. Наличие случайного поля в неупорядоченном полупроводнике приводит, вообще говоря, к сильной неоднородности пространственного распределения объемной плотности носителей заряда. Последнее обстоятельство резко усложняет задачу ввиду необходимости учета диффузионных токов. В рассматриваемых условиях, однако, эта трудность не возникает. Действительно, условие (2) показывает, что для плавного случайного поля среднеквадратичная флуктуация объемной плотности заряда есть величина более высокого порядка малости и поэтому может быть опущена.

В настоящей работе исследованы явления переноса энергии электронами в делокализованных состояниях в описанной выше модели неупорядоченного полупроводника.

Общее рассмотрение

Плотность тока $\bar{\mathbf{j}}$ и плотность потока энергии $\bar{\mathbf{q}}$ в неравномерно нагретом полупроводнике определяются уравнениями:

$$\bar{\mathbf{j}} = \sigma\left(\bar{\mathbf{E}} - Q\bar{\nabla}T + \frac{1}{e}\bar{\nabla}\mu\right), \tag{3}$$

$$\bar{\mathbf{q}} = \Pi\bar{\mathbf{j}} - \varkappa\bar{\nabla}T - \frac{\mu}{e}\bar{\mathbf{j}}. \tag{4}$$

Здесь Q — термоэдс, Π — коэффициент Пельтье, $\varkappa$ — теплопроводность, σ — электропроводность, μ — уровень Ферми; заряд электрона равен — e.

Введем обозначения:

$$\sigma = L^{(1)}, \tag{5}$$

$$Q = \frac{1}{TL^{(1)}}\left(\frac{\mu}{e}L^{(1)} + L^{(2)}\right), \tag{6}$$

$$\varkappa = \frac{1}{T}\left[L^{(4)} - \frac{(L^{(2)})^2}{L^{(1)}}\right]. \tag{7}$$

Тогда уравнения (3) и (4) преобразуются к виду

$$\bar{\mathbf{j}} = L^{(1)}\left(\bar{\mathbf{E}} + \frac{1}{e}\bar{\nabla}\mu\right) - \left(L^{(2)} + \frac{\mu}{e}L^{(1)}\right)\frac{\bar{\nabla}T}{T}, \tag{8}$$

$$\bar{\mathbf{q}} = L^{(2)}\left(\bar{\mathbf{E}} + \frac{1}{e}\bar{\nabla}\mu\right) - \left(L^{(4)} + \frac{\mu}{e}L^{(2)}\right)\frac{\bar{\nabla}T}{T}. \tag{9}$$

Для кинетических коэффициентов $L^{(i)}$ существуют точные выражения типа формулы Кубо для электропроводности [4]. В указанных выше условиях мы имеем

$$L^{(1)} = e^2\int K(E)\left(-\frac{\partial n_F}{\partial E}\right)dE, \tag{10}$$

$$L^{(2)} = -e\int EK(E)\left(-\frac{\partial n_F}{\partial E}\right)dE, \tag{11}$$

$$L^{(4)} = \int E^2K(E)\left(-\frac{\partial n_F}{\partial E}\right)dE. \tag{12}$$

Здесь

$$K(E) = \frac{2\pi\hbar}{3m^2V}\left\langle\sum_{n,n'}|\langle n|p|n'\rangle|^2\delta(E-E_n)\delta(E-E_{n'})\right\rangle, \tag{13}$$

а $|n\rangle$ — собственная функция одноэлектронного гамильтониана.

Заметим, что применяемый метод вычисления кинетических коэффициентов не требует знания явного вида собственных функций одноэлектронного гамильтониана. С помощью несложных преобразований можно убедиться, что в действительности для решения задачи достаточно вычислить мнимую часть функции Грина соответствующего уравнения Шредингера. Способ вычисления последней для плавного случайного поля указан в работе [5].

При вычислении статистической электропроводности σ в работе [2] была получена формула

$$\sigma = -\frac{e^2 m^{1/2}\zeta\xi\psi_1^{1/4}\, i}{32\sqrt{2}\,\pi^2\hbar^2\Gamma(4)}\int\limits_{-\alpha}^{\infty}\frac{dz}{\operatorname{ch}^2\frac{\xi z}{2}}\int\limits_{0}^{\infty}dt t^3\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx x \times$$
$$\times \exp\left\{-\frac{x^2}{2} - ix(z+\alpha) + ixt + i\frac{x^3}{\zeta^2}\right\}. \quad (14)$$

В формуле (14) использованы следующие обозначения:

$$\zeta = \left(\frac{8m\psi_1^{3/2}}{\hbar^2\psi_2}\right)^{1/2}, \quad \xi = \frac{\psi_1^{1/2}}{kT}, \quad \alpha = \frac{\mu}{\psi_1^{1/2}}. \quad (15)$$

Введем по определению величины

$$M^{(n)} = -\frac{e^2 m^{1/2}\psi_1^{1/4}\zeta\xi i}{32\sqrt{2}\,\pi^2\hbar^2\Gamma(4)}\left(-\frac{\psi_1^{1/2}}{e}\right)^n\int\limits_{0}^{\infty}dt t^3\int\limits_{-\infty}^{\infty}dx x \times$$
$$\times \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + ix(t-\alpha) + i\frac{x^3}{\zeta^2}\right\}\int\limits_{-\alpha}^{\infty}\frac{dz z^n}{\operatorname{ch}^2\frac{\xi z}{2}}e^{-ixz}. \quad (16)$$

Из формул (5)—(7), (10)—(12), (14) и (16) следует, что

$$M^{(0)} = \sigma, \quad (17)$$

$$M^{(1)} = \frac{\mu}{e}L^{(1)} + L^{(2)}, \quad (18)$$

$$\varkappa = \frac{1}{T}\left[M^{(2)} - \frac{(M^{(1)})^2}{M^{(0)}}\right]. \quad (19)$$

Легко убедиться, что

$$\int\limits_{-\alpha}^{\infty}\frac{dz z^n}{\operatorname{ch}^2\frac{\xi z}{2}}e^{-izx} = \left(i\frac{d}{dx}\right)^n\left\{\frac{4e^{\alpha(\xi+ix)}}{\xi+ix}\times\right.$$
$$\left.\times {}_2F_1\left(2,\ 1+i\frac{x}{\xi};\ \ 2+i\frac{x}{\xi};\ -e^{\xi\alpha}\right)\right\}, \quad (20)$$

где ${}_2F_1(a, b; c; z)$ — гипергеометрическая функция Гаусса.

В невырожденном случае, когда $\alpha<0$, $\xi|\alpha|\gg 1$, из выражений (16) и (20) следует, что

$$M^{(n)} = -\frac{e^2 m^{1/2}\psi_1^{1/4}\zeta\xi i}{8\sqrt{2}\,\pi^2\hbar^2\Gamma(4)}\left(-\frac{\psi_1^{1/2}}{e}\right)^n \int_0^\infty dt t^3 \int_{-\infty}^\infty dx x \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + ix(t-\alpha) + i\frac{x^3}{\zeta^2}\right\}\left(i\frac{d}{dx}\right)^n \frac{e^{\alpha(\xi+ix)}}{\xi+ix}. \qquad (21)$$

Поскольку

$$\left(i\frac{d}{dx}\right)^n \frac{e^{\alpha(\xi+ix)}}{\xi+ix} = \left(-\frac{d}{d\xi}\right)^n \frac{e^{\alpha(\xi+ix)}}{\xi+ix}, \qquad (22)$$

то в рассматриваемых условиях имеет место соотношение

$$M^{(n)} = \frac{1}{T}\left(-\frac{kT^2}{e}\frac{d}{dT}\right)^n (M^{(0)}T), \quad \mu<0, \quad |\mu|\gg kT. \qquad (23)$$

Рассмотрим вырожденный случай, $\xi\alpha\gg 1$. Легко видеть, что выражение для $M^{(n)}$ преобразуется к виду

$$M^{(n)} = -\frac{e^2 m^{1/2}\psi_1^{1/4}\zeta i}{8\sqrt{2}\,\pi^2\hbar^2\,\Gamma(4)}\left(-\frac{\psi_1^{1/2}}{e}\right)^n \int_0^\infty dt t^3 \int_{-\infty}^\infty dx x \times$$

$$\times \exp\left\{-\frac{x^2}{2} + i(t-\alpha)x + i\frac{x^3}{\zeta^2}\right\} \times \left(i\frac{d}{dx}\right)^n \frac{\pi x}{\xi\,\mathrm{sh}\,\frac{\pi x}{\xi}}. \qquad (24)$$

Поскольку

$$e^{-ix\alpha}\left(i\frac{d}{\partial x}\right)^n \frac{\pi x}{\xi\,\mathrm{sh}\,\frac{\pi x}{\xi}} = \left(\frac{\pi}{\xi}\right)^n \times$$

$$\times \left[\int^{\alpha} \alpha\alpha_1 \frac{d}{d\left(\frac{\pi}{\xi}\right)}\right]^n \frac{\pi x}{\xi\,\mathrm{sh}\,\frac{\pi x}{\xi}}\, e^{-ix\alpha_1}, \qquad (25)$$

то при $\xi\alpha\gg 1$ получим, переходя к обычным обозначениям,

$$M^{(n)} = \left(-\frac{T}{e}\right)^n \left[\int^{\mu} d\mu_1 \frac{d}{dT}\right]^n M^{(0)}, \quad \mu\gg kT. \qquad (26)$$

Теплопроводность

Рассмотрим сначала невырожденный случай, когда $\mu<0$, $|\mu|\gg kT$. Из формул (17), (19) и (23) следует, что в этих условиях

$$\varkappa = \frac{k^2T^3}{e^2}\left[\frac{d^2\sigma}{dT^2} - \frac{1}{\sigma}\left(\frac{d\sigma}{dT}\right)^2\right] + \frac{2k^2T^2}{e^2}\frac{d\sigma}{dT} + \frac{k^2T}{e^2}\sigma. \qquad (27)$$

Видим, что выражение (27) не есть, вообще говоря, закон Видемана — Франца. Вместе с тем таковой получается в известных предельных случаях [2]:

1. $\psi_1^{1/2}\gg kT$

$$\sigma = \frac{e^2 m\psi_1}{8\pi\hbar^3\psi_2^{1/2}}\, e^{\frac{\mu}{kT}}. \qquad (28)$$

2. $2(kT)^2 \gg \psi_1$

$$\sigma = \frac{e^2 m (kT)^2}{2\pi\hbar^3 \psi_2^{1/2}} e^{\frac{\mu}{kT}}. \tag{29}$$

Из формул (27) и (28), как легко видеть, следует ($\psi_1^{1/2} \gg kT$)

$$\varkappa = \frac{k^2 T}{e^2} \sigma. \tag{30}$$

В противоположном случае, когда $2(kT)^2) \gg \psi_1$, как нетрудно убедиться с помощью формул (27) и (29), величина $\varkappa$ связана с электропроводностью соотношением

$$\varkappa = 3 \frac{k^2 T}{e^2} \sigma. \tag{31}$$

Если газ вырожден ($\mu \gg kT$) и, далее, $\psi_1^{1/2} \gg \pi kT$, для электропроводности имеет место следующее выражение:

$$\sigma = \frac{e^2 m \psi_1 e^{-\frac{\mu^2}{4\psi_1}}}{(2\pi)^{3/2} \hbar^3 \psi_2^{1/2}} \left[D_{-3}\left(-\frac{\mu}{\psi_1^{1/2}}\right) + \frac{\pi^2}{6} \frac{(kT)^2}{\psi_1} D_{-1}\left(-\frac{\mu}{\psi_1^{1/2}}\right)\right]. \tag{32}$$

Здесь $D_\nu(z)$ — функция параболического цилиндра.

С учетом формул (17), (19), (26) и (32) получим

$$\varkappa = \frac{\pi^2}{3} \frac{k^2 T}{e^2} \sigma. \tag{33}$$

В выражениях (30), (31) и (33) под σ следует понимать выражение для электропроводности, использованное при выводе, а именно (28), (29) и (32) соответственно. Из вида выражения (26) ясно, что при выводе формулы (33) учет малого второго слагаемого в формуле (32) необходим принципиально. В противном случае теплопроводность обращается в нуль. Вместе с тем, пользуясь готовым выражением (33), под σ следует понимать только первое слагаемое формулы (32), отбрасывая второе как величину более высокого порядка малости, поскольку оно содержит малый сомножитель $(\pi kT)^2/\psi_1$.

Отметим, что в условиях, когда $2(kT)^2 \gg \psi_1$, можно получить выражение для теплопроводности, свободное от ограничения $\mu < 0$, $|\mu| \gg kT$. Для этого заметим, что при $2(kT)^2 \gg \psi_1$ из формулы (14), как можно показать, следует соотношение

$$\sigma = \frac{e^2 m (kT)^2}{2\pi\hbar^3 \psi_2^{1/2}} F_1\left(\frac{\mu}{kT}\right), \tag{34}$$

где $F_j(z)$ — интеграл Ферми — Дирака:

$$F_j(z) = \frac{1}{\Gamma(1+j)} \int_0^\infty \frac{dt\, t^j}{1 + \exp(t - z)}. \tag{35}$$

Видим, что формула (34) есть частный случай известного выражения [6]

$$\sigma = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \frac{e^2 m^{1/2}}{\hbar^3} \tau_{p0} (kT)^{r+\frac{3}{2}} \Gamma\left(r+\frac{5}{2}\right) F_{r+\frac{1}{2}}\left(\frac{\mu}{kT}\right) \tag{36}$$

при

$$r = \frac{1}{2}, \quad \tau_{p0} = \frac{3\pi}{8}\left(\frac{m}{2\psi_2}\right)^{1/2}.$$

Используя полученное время релаксации импульса при рассеянии на случайном поле τ_p и обычную формулу для теплопроводности, вытекающую из кинетического уравнения Больцмана, получим

$$\varkappa = \frac{12F_1\left(\frac{\mu}{kT}\right) F_3\left(\frac{\mu}{kT}\right) - 9F_2^2\left(\frac{\mu}{kT}\right)}{F_1^2\left(\frac{\mu}{kT}\right)} \left(\frac{k}{e}\right)^2 \sigma T. \tag{37}$$

Легко установить границы, в которых в нашей задаче применимо кинетическое уравнение Больцмана, а следовательно и формула (37). Для этой цели достаточно воспользоваться общим условием $\hbar \ll \tau_p E$, где E — характерная энергия носителя заряда, и условием (2). Видим, что кинетическое уравнение применимо, если $kT > \psi_1^{1/2}$ и $|\mu| \gg kT$, $\mu < 0$ или $\mu > \psi_1^{1/2}$ и $\mu \gg kT$. В первом случае (невырожденном) формула (37) переходит в выражение (31).

Отметим, что совершенно аналогично формуле (37) в условиях, когда применимо кинетическое уравнение Больцмана, можно вычислить кинетические характеристики неупорядоченных полупроводников и в магнитном поле.

В заключение автор выражает свою благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за предложенную тему и многочисленные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Жуматий П. Г. — Деп. ВИНИТИ, № 1068—75 от 14.04 1975 г.
2. Жуматий П. Г. — Деп. ВИНИТИ, № 1123—75 от 18.04 1975 г.
3. Жуматий П. Г. — Деп. ВИНИТИ, № 1122—75 от 18.04 1975 г.
4. Luttinger J. M. — «Phys. Rev.», 135, A 1505, 1964.
5. Бонч-Бруевич В. Л. — В кн. Статистическая физика и квантовая теория поля. М., 1973.
6. Ансельм А. И. Введение в физику полупроводников. М.—Л., 1962.

Поступила в редакцию
3.12 1975 г.

Кафедра
полупроводников